

TK 155.807

KFKI-1985-101

MARTIN A.  
SZÖKE J.

MOLECULES IN MOLECULES (MIM)  
ELEKTRONSZÍNKÉP SZÁMÍTÓ PROGRAM

*Hungarian Academy of Sciences*

CENTRAL  
RESEARCH  
INSTITUTE FOR  
PHYSICS

BUDAPEST

2017



MOLECULES IN MOLECULES (MIM)  
ELEKTRONSZÍNKÉP SZÁMÍTÓ PROGRAM

MARTIN A.\*, SZŐKE J.

Központi Fizikai Kutató Intézet  
1525 Budapest 114, Pf. 49

\*BME Fizikai Kémia Tanszék, Budapest



#### KIVONAT

MIM típusu szemiempirikus elektronszinképi paraméterek számítására alkalmas COMMODORE-64 gépre írt programot ismertetünk.

#### АННОТАЦИЯ

Дается описание программы, написанной для машины COMMODORE-64, служащей для расчета параметров типа MIM полуэмпирических электронных спектров.

#### ABSTRACT

Complete listing for the calculation of the parameters of electronic spectra by using MIM method.



A Molecules in Molecules /MIM/ típusu szemielemző elektronikus szintézis számítási elvi ismertetését e sorozat egy korábbi kötetében adtuk meg [1,2]. Az alábbiakban a számításhoz COMMODORE-64 PC-re alkalmazott BASIC nyelven írt programját ismertetjük.

A program interaktív felépítésű, azaz indítás után a bemenő adatok megadása kérdés-felelet formában történik. A számításhoz szükséges bemenő adatok:

1. Molekula neve /tetszőleges hosszúságú szöveg/.
2. Akceptor részrendszerek száma.
3. Donor részrendszerek száma.
4. Alapmolekula neve: a bázisként használt molekularész neve /tetszőleges hosszúságú szöveg/.
5. Akceptor részrendszerek nevei: a 2. pontban megadott számú akceptor-részrendszer neve /tetszőleges hosszúságú szöveg/.
6. Donor részrendszerek nevei: a 3. pontban megadott számú donor-részrendszer neve /tetszőleges hosszúságú szöveg/.
7. Alapmolekula  $\pi$ -centrumszáma és  $\pi$ -elektronszáma /<100/.
8. Akceptor részrendszerek  $\pi$ -centrumszámai és  $\pi$ -elektronszámai /<100/.
9. Donor részrendszerek  $\pi$ -centrumszámai és  $\pi$ -elektronszámai /<100/.
10. Alapmolekula kísérleti ionizációs potenciálja és elektronaffinitása /eV/.
11. Akceptor részrendszerek kísérleti elektronaffinitásai /eV/.
12. Donor részrendszerek kísérleti ionizációs potenciáljai /eV/.
13.  $\pi$ -centrumok koordinátái /a  $\pi$ -centrumok a megadás sorrendjének megfelelő számot kapnak/.
14. Részrendszerek kapcsolódó atompárjainak megadása /a kapcsolódó atompár 13-ban kapott sorszámai, egymástól - jellel elválasztva/.
15. A kapcsolódó atompároknak megfelelő rezonanciaintegrálok /eV/.
16. Rezonanciaintegrál variáció esetén a 15. pont megismétlése a kívánt rezonanciaintegrál sorozatok számának megfelelően.
17. Részrendszer alapállapotok molekulapályáinak atomi pályakoefficiensai /LCAO/.
18. Részrendszer gerjesztett állapotok átmeneti energiái és hullámfüggvényei /az átmeneti energiák beadásának befejezése:  $\emptyset$  beadásával; hullámfüggvény tagok beadásának befejezése:  $\emptyset$  koefficiens beadásával; alap-gerjesztett átmenetek megadása: a 17-ben megadott molekulapálya sorszámokkal, azokat egymástól - jellel elválasztva/.
19. Figyelembe vett CT átmenetek megadása /a 17-ben megadott molekulapálya sorszámokkal, azokat egymástól - jellel elválasztva/.
20.  $\pi$ -centrumok vegyértékállapotú ionizációs potenciáljai és elektronaffinitásai /eV/.



A programban előforduló fontosabb azonosítók jelentését a programlista elején kommentárok formájában adtuk meg.

A PC memóriakapacitásának jobb kihasználása érdekében a programot több alprogramra bontottuk, amelyek közül egyidejűleg mindig csupán az egyik terhel a memóriát. A számítás indításához a MIM elnevezésű programrészt kell beolvastatni a mágneslemezzől. Ez a programrész kéri a fentebb ismertetett bemenő adatokat. Az adatok beolvasása után ez a MIM nevű alprogram egy, a további alprogramok számára hozzáférhető ADAT nevű szekvenciális adat file-t hoz létre a mágneslemezen. Az adatok bevitelét és az adatállomány létrehozását követően a további alprogramok beolvasása automatikusan történik. Először egy PRINT nevű alprogramot hív be, amely az ADAT file-ból kiolvasott adatokból elkészíti a bemenő adatokat tartalmazó nyomtatási listát. A nyomtatás befejezését követően ez a programrész hívja a számításokat végző CALC nevű alprogramot, amely az ADAT file adatait kiolvasva elvégzi a számításokat, és az eredményeket kinyomtatja.

A program futtatásához - a fentiek értelmében - az alapgéphez csatlakoztatni kell egy nyomtatót és egy diszk meghajtót, amelybe egy olyan lemezt kell elhelyezni, amelyen a MIM, a PRINT és a CALC nevű programok mindegyike megtalálható, és ezen felül elegendő üres hely áll rendelkezésre a létesítendő ADAT nevű adatmező részére.

Az alábbiakban megadjuk a fenti három alprogramból álló teljes programlistát, valamint az [1]-ben közölt alkalmazási példa futtatási listáját.



```

100 REM  ELEKTRONSZINKEP SZAMITAS (MIM)
110 REM  "-----"
120 REM
130 REM      A FONTOSABB AZONOSITOK JELENTESE:
140 REM  "-----"
150 REM
160 REM  A:      AKCEPTOR RESZRENDSZEREK SZAMA
170 REM  D:      DONOR RESZRENDSZEREK SZAMA
180 REM
190 REM  MM$:     MOLEKULA NEVE
200 REM  BM$:     ALAPMOLEKULA NEVE
210 REM  A$(A):   A-IK AKCEPTOR NEVE
220 REM  D$(D):   D-IK DONOR NEVE
230 REM
240 REM  BN:      ALAPMOLEKULA  $\pi$ -CENTRUMSZAMA
250 REM  PB:      ALAPMOLEKULA  $\pi$ -ELEKTRONSZAMA
260 REM  AN(A):   A-IK AKCEPTOR  $\pi$ -CENTRUMSZAMA
270 REM  PA(A):   A-IK AKCEPTOR  $\pi$ -ELEKTRONSZAMA
280 REM  DN(D):   D-IK DONOR  $\pi$ -CENTRUMSZAMA
290 REM  PD(D):   D-IK DONOR  $\pi$ -ELEKTRONSZAMA
300 REM  PN:      OSSZ.  $\pi$ -CENTRUMSZAM
310 REM
320 REM  TR:      ATMENETEK MAXIMALIS SZAMA
330 REM  CN:      CT ATMENETEK MAX. SZAMA
340 REM  AM:      LEGNAGYOBB  $\pi$ -CENTRUMSZAMU RESZRENDSZER  $\pi$ -CENTRUMAINAK SZAMA
350 REM  MA:      LEGNAGYOBB  $\pi$ -CENTRUMSZAMU RESZRENDSZER ATMENETEINEK MAX.SZAMA
360 REM
370 REM  BT:      ALAPMOLEKULA FIGYELEMBEVETT ATMENETEINEK SZAMA
380 REM  AT(A):   A-IK AKCEPTOR FIGYELEMBEVETT ATMENETEINEK SZAMA
390 REM  AT:      OSSZES AKCEPTOR FIGYELEMBEVETT ATMENETEINEK SZAMA
400 REM  DT(D):   D-IK DONOR FIGYELEMBEVETT ATMENETEINEK SZAMA
410 REM  DT:      OSSZES DONOR FIGYELEMBEVETT ATMENETEINEK SZAMA
420 REM  OT:      OSSZES FIGYELEMBEVETT NEM CT ATMENETEK SZAMA
430 REM  BA(A):   FIGYELEMBEVETT ALAP--A-IK AKCEPTOR KÖZTI CT ATMENETEK SZAMA
440 REM  DB(D):   FIGYELEMBEVETT D-IK DONOR--ALAP KÖZTI CT ATMENETEK SZAMA
450 REM  DA(D,A): FIGYELEMBEVETT D-IK DONOR--A-IK AKCEPTOR CT ATMENETEK SZAMA
460 REM
470 REM  N:      KÖLCSONHATASI MATRIX MERETE (OSSZ. FIGYELEMBEVETT ATMENET + 1)
480 REM
490 REM  ED(TR):   ENERGIÁK (ALAP-AKCEPTOROK-DONOROK SORRENDEN)
500 REM  ED(N):   N-IK MATRIXSOR DIAGONALIS CT-BLOKKJA ELŐTTI ELEMÉK SZAMA
510 REM  P(TR,MA+1): ATMENETEK HULLAMFÜGGVÉNYEINEK KOEFFICIENSEI
520 REM  PL(TR,MA+1): HULLAMFÜG.V.KOEFF.-HEZ TARTOZO ATMENET ALAPÁLLAPOTU MO-JA
530 REM  PH(TR,MA+1): HULLAMFÜG.V.KOEFF.-HEZ TARTOZO ATMENET GERJ. ÁLLAPOTU MO-JA
540 REM  CL(CN+TR): CT ATMENETEK ALAPÁLLAPOTU MO-JA
550 REM  CH(CN+TR): CT ATMENETEK GERJESZTETT ÁLLAPOTU MO-JA
560 REM  C(PN,PN): PN-IK MOLEKULÁRALYLA LCÁO KOEFFICIENSEI
570 REM
580 REM  X(PN):     $\pi$ -CENTRUMOK X KOORDINATAJA
590 REM  Y(PN):     $\pi$ -CENTRUMOK Y KOORDINATAJA
600 REM  Z(PN):     $\pi$ -CENTRUMOK Z KOORDINATAJA
610 REM
620 REM  AC(A+D):   HANY HELYEN KAPCSOLODIK A RESZRENDSZER MASIK RESZR.-HEZ
630 REM  HL(A+D,3*AM): KAPCSOLODO ATOMPAR EGYIK ATOMJA (AKC.-DON. SORRENDEN)
640 REM  HH(A+D,3*AM): KAPCSOLODO ATOMPAR MASIK ATOMJA
650 REM  BE(PN,PN): REZONANCIAINTEGRALOK (ELSO SOROZAT)
660 REM  BE:      REZONANCIAINTEGRAL VARIACIOK JELZOJE
670 REM  SO:      REZONANCIAINTEGRAL VARIACIOK SZAMA
680 REM  MD:      REZONANCIAINTEGRALOK OSSZES SZAMA (VARIACIOKKAL EGYUTT)
690 REM  BS(MD):   REZONANCIAINTEGRALOK (VARIACIOKKAL EGYUTT)
700 REM
710 REM  IB:      ALAPMOLEKULA KISERLETI IONIZACIOS POTENCIALJA
720 REM  AB:      ALAPMOLEKULA KISERLETI ELEKTRONAFFINITASA
730 REM  A(A):     A-IK AKCEPTOR KISERLETI ELEKTRONAFFINITASA
740 REM  I(D):     D-IK DONOR KISERLETI IONIZACIOS POTENCIALJA
750 REM  IV(PN):    $\pi$ -CENTRUMOK VEGYERTEKÁLLAPOTU IONIZACIOS POTENCIALJAI
760 REM  AV(PN):    $\pi$ -CENTRUMOK VEGYERTEKÁLLAPOTU ELEKTRONAFFINITASAI

```



```

770 REM
780 REM U(PN):      A PN-IK MOLEKULAPALYAHÓZ TARTOZÓ ATOMI PALYAK SZÁMA
790 REM T(PN):      A PN-IK MOLEKULAPALYAHÓZ TARTOZÓ ELSŐ ATOMI PALYA SORSZÁMA
800 REM S(CN+TR):   CT ATMENETEK (IP-ER) ÉRTEKEI
810 REM BK(TR):     ATMENETEK HULLAMFÜGGVÉNYEIBEN SZEREPLŐ TAGOK SZÁMA
820 REM KB:         LEGTÖBB TAGBÓL ALLO HULLAMFÜGGVÉNY TAGSZÁMA
830 REM
840 REM BEMENŐ ADATOK:
850 REM "-----"
860 REM PROGRAMNEV: MIM
870 REM "-----"
880 REM
890 PRINT "M"
900 POKE 53280,9
910 POKE 53281,6
920 PRINT "MOLEKULA NEVE:"
930 INPUT MM$
940 IF MM$="" THEN MM$="MOLEKULA"
950 PRINT : PRINT
960 INPUT "AKCEPTOR RESZRENDSZEREK SZÁMA";A
970 INPUT "DONOR RESZRENDSZEREK SZÁMA";D
980 PRINT
990 I=0
1000 PRINT "ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM"
1010 GET A$: IF A$="" THEN 1010
1020 IF A$="N" THEN 920
1030 IF A$="I" THEN 1060
1040 I=I+1
1050 GOTO 1000
1060 DIM A$(A),D$(D),AN(A),DN(D),A(A),I(D),AT(A),DT(D),PA(A),PD(D)
1070 DIM BA(A),DB(D),DA(D,A),AC(A+D)
1080 PRINT
1090 FOR J=1 TO I+1
1100 PRINT "J"
1110 NEXT J
1120 PRINT "ALAPMOLEKULA NEVE:"
1130 INPUT BM$
1140 IF BM$="" THEN BM$="BAZISMOLEKULA"
1150 PRINT
1160 IF A=0 THEN 1230
1170 PRINT "AKCEPTOR RESZRENDSZEREK NEVE:"
1180 FOR I=1 TO A
1190 INPUT A$(I)
1200 IF A$(I)="" THEN A$(I)="AKCEPTOR"
1210 NEXT I
1220 PRINT
1230 IF D=0 THEN 1300
1240 PRINT "DONOR RESZRENDSZEREK NEVE:"
1250 FOR I=1 TO D
1260 INPUT D$(I)
1270 IF D$(I)="" THEN D$(I)="DONOR"
1280 NEXT I
1290 PRINT
1300 PRINT "ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM"
1310 GET A$: IF A$="" THEN 1310
1320 IF A$="N" THEN PRINT "J" : GOTO 1120
1330 IF A$="I" THEN 1350
1340 GOTO 1300
1350 PRINT "J"
1360 PRINT "SIK A MOLEKULA? IGEN VAGY NEM"
1370 GET A$: IF A$="" THEN 1370
1380 PRINT "J"
1390 IF A$="I" THEN Z=0 : PRINT "SIK MOLEKULA" : GOTO 1420
1400 IF A$="N" THEN Z=1 : PRINT "NEM SIK MOLEKULA" : GOTO 1420
1410 GOTO 1360
1420 PRINT
1430 INPUT "ALAPMOLEKULA #-CENTRUMSZÁMA ";BN

```



```

1440 INPUT "                                     π-ELEKTRONSZAMA";PB
1450 CN=0
1460 AM=BN
1470 M=BN
1480 M1=(BN-PB/2)*PB/2
1490 MA=M1
1500 IF A=0 THEN 1630
1510 PRINT
1520 FOR I=1 TO A
1530 PRINT
1540 PRINT I;"-IK AKCEPTOR:"
1550 INPUT "#####π-CENTRUMSZAMA ";AN(I)
1560 INPUT "#####π-ELEKTRONSZAMA";PA(I)
1570 IF AN(I)>AM THEN AM=AN(I)
1580 M=M+AN(I)
1590 M1=M1+(AN(I)-PA(I)/2)*PA(I)/2
1600 IF (AN(I)-PA(I)/2)*PA(I)/2 > MA THEN MA=(AN(I)-PA(I)/2)*PA(I)/2
1610 CN=CN+PB/2*(AN(I)-PA(I)/2)
1620 NEXT I
1630 IF D=0 THEN 1840
1640 PRINT
1650 FOR I=1 TO D
1660 PRINT
1670 PRINT I;"-IK DONOR:"
1680 INPUT "#####π-CENTRUMSZAMA ";DN(I)
1690 INPUT "#####π-ELEKTRONSZAMA";PD(I)
1700 IF DN(I)>AM THEN AM=DN(I)
1710 M=M+DN(I)
1720 M1=M1+(DN(I)-PD(I)/2)*PD(I)/2
1730 IF (DN(I)-PD(I)/2)*PD(I)/2 > MA THEN MA=(DN(I)-PD(I)/2)*PD(I)/2
1740 CN=CN+PD(I)/2*(BN-PB/2)
1750 NEXT I
1760 IF A=0 OR D=0 THEN 1840
1770 H=0
1780 FOR I=1 TO D
1790 FOR J=1 TO A
1800 H=H+(AN(J)-PA(J)/2)*PD(I)/2
1810 NEXT J
1820 NEXT I
1830 CN=CN+H
1840 PN=M
1850 TR=M1
1860 PRINT : PRINT
1870 PRINT "ADATOK RENDBEN? BILLEN VAGY ENSEM?"
1880 GET A$: IF A$="" THEN 1880
1890 IF A$="N" THEN 1350
1900 IF A$="I" THEN 1920
1910 GOTO 1870
1920 DIM X(PN),Y(PN),Z(PN),IV(PN),AV(PN),U(PN),T(PN),S(CN+TR)
1930 DIM ED(TR),C(PN,PN),R(PN,PN),P(TR,MA+1),BK(TR),HL(A+D,3*AM),HH(A+D,3*AM)
1940 DIM PL(TR,MA+1),PH(TR,MA+1),CL(CN+TR),CH(CN+TR),BE(PN,PN)
1950 PRINT "I"
1960 PRINT "      KISERLETI IONIZACIOS POTENCIALOK"
1970 PRINT "      ES ELEKTRONAFFINITASOK (EV):"
1980 PRINT : PRINT
1990 IF A=0 THEN 2010
2000 INPUT "ALAPMOLEKULA IP:";IB
2010 IF D=0 THEN 2030
2020 INPUT "ALAPMOLEKULA EA:";AB
2030 PRINT
2040 IF A=0 THEN 2090
2050 FOR I=1 TO A
2060 PRINT I;"II. AKCEPTOR EA:";
2070 INPUT A(I)
2080 NEXT I
2090 IF D=0 THEN 2150
2100 PRINT

```



```
2110 FOR I=1 TO D
2120 PRINT I;"II. DONOR      IP:";
2130 INPUT I(I)
2140 NEXT I
2150 PRINT
2160 PRINT "      ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM?"
2170 GET A$: IF A$="" THEN 2170
2180 IF A$="N" THEN 1950
2190 IF A$="I" THEN 2210
2200 GOTO 2160
2210 PRINT "I"
2220 PRINT "II-CENTRUMOK X,Y,Z KOORDINATAI:"
2230 M=BN
2240 PRINT : PRINT
2250 PRINT "ALAPMOLEKULA:"
2260 PRINT
2270 FOR J=1 TO BN
2280 PRINT J;"II. CENTRUM:"
2290 INPUT "XXXXXXXXXXXXX=";X(J)
2300 INPUT "XXXXXXXXXXXXY=";Y(J)
2310 IF Z<>0 THEN INPUT "XXXXXXXXXXXXZ=";Z(J)
2320 PRINT
2330 NEXT J
2340 IF A=0 THEN 2490
2350 FOR I=1 TO A
2360 PRINT
2370 PRINT I;"-IK AKCEPTOR RESZRENDSZER:"
2380 PRINT
2390 FOR J=1 TO AN(I)
2400 PRINT M+J;"II. CENTRUM:"
2410 INPUT "XXXXXXXXXXXXX=";X(M+J)
2420 INPUT "XXXXXXXXXXXXY=";Y(M+J)
2430 IF Z<>0 THEN INPUT "XXXXXXXXXXXXZ=";Z(M+J)
2440 PRINT
2450 NEXT J
2460 M=M+AN(I)
2470 NEXT I
2480 PRINT
2490 IF D=0 THEN 2630
2500 FOR I=1 TO D
2510 PRINT
2520 PRINT I;"-IK DONOR RESZRENDSZER:"
2530 PRINT
2540 FOR J=1 TO DN(I)
2550 PRINT M+J;"II. CENTRUM:"
2560 INPUT "XXXXXXXXXXXXX=";X(M+J)
2570 INPUT "XXXXXXXXXXXXY=";Y(M+J)
2580 IF Z<>0 THEN INPUT "XXXXXXXXXXXXZ=";Z(M+J)
2590 PRINT
2600 NEXT J
2610 M=M+DN(I)
2620 NEXT I
2630 PRINT
2640 PRINT "      ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM?"
2650 GET A$: IF A$="" THEN 2650
2660 IF A$="N" THEN 2210
2670 IF A$="I" THEN 2690
2680 GOTO 2640
2690 PRINT "I"
2700 PRINT "      RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
2710 PRINT "      ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
2720 FOR I=1 TO 500 : NEXT I
2730 PRINT : PRINT
2740 BE=0
2750 PRINT"      KIVANJA-E"
2760 PRINT "      A REZONANCIAINTEGROKAT VARIÁLNI?"
2770 PRINT : PRINT
```



```

2780 PRINT "          MIBEN VAGY MIBEN?"
2790 GET A$: IF A$="" THEN 2790
2800 IF A$="N" THEN 2920
2810 IF A$="I" THEN 2830
2820 GOTO 2780
2830 BE=1
2840 PRINT : PRINT
2850 PRINT "  HANYFELE REZONANCIAINTEGRAL SZOROZATTAL"
2860 PRINT "          KIVAN FUTTATNI?"
2870 PRINT : PRINT : PRINT
2880 INPUT S0
2890 IF S0<1 THEN 2850
2900 IF S0=1 THEN BE=0 : GOTO 2920
2910 S0=S0-1
2920 PRINT "J"
2930 PRINT "  RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
2940 PRINT "          ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
2950 FOR I=1 TO 500 : NEXT I
2960 PRINT : PRINT
2970 IF A=0 THEN 3510
2980 PRINT "  VAN-E 1-NEL TOBB HELYEN KAPCSOLODO "
2990 PRINT "          AKCEPTOR CSOPORT?"
3000 PRINT : PRINT
3010 PRINT "          MIBEN VAGY MIBEN?"
3020 GET A$: IF A$="" THEN 3020
3030 IF A$="N" THEN HM=0 : PRINT "J" : GOTO 3180
3040 IF A$<>"I" THEN PRINT "TTTTT" : GOTO 2980
3050 PRINT "J"
3060 PRINT "  RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
3070 PRINT "          ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
3080 PRINT : PRINT
3090 HM=1
3100 PRINT "AZ AKCEPTOR HANY HELYEN KAPCSOLODIK"
3110 PRINT "MASIK RESZRENDSZERHEZ?"
3120 PRINT
3130 FOR I=1 TO A
3140 PRINT : PRINT
3150 PRINT I;"II-IK AKCEPTOR:"
3160 INPUT "TTTTTTTTTTTTTTTTTTTT";AC(I)
3170 NEXT I
3180 PRINT "J"
3190 PRINT "  RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
3200 PRINT "          ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
3210 PRINT
3220 PRINT "  (KAPCS. MEGADASI FORMATUMA PL: 2-14)"
3230 PRINT : PRINT
3240 IF BE=1 THEN PRINT "  1. SZOROZAT:"
3250 PRINT
3260 FOR I=1 TO A
3270 PRINT : PRINT
3280 IF HM=0 THEN AC(I)=1 : J=1 : GOTO 3330
3290 FOR J=1 TO AC(I)
3300 R$=""
3310 IF J<>1 THEN PRINT : INPUT " KOVETKEZO KAPCSOLODAS      ";R$ : GOTO 3360
3320 PRINT
3330 R$=""
3340 PRINT I;"II-IK AKCEPTOR--KAPCSOLODO RESZRENDSZER:"
3350 INPUT " KAPCSOLODO ATOMJAI      ";R$
3360 IF LEN(R$)<3 THEN 3350
3370 IF ASC(MID$(R$,2,1))>45 AND ASC(MID$(R$,3,1))>45 THEN 3350
3380 MH=LEN(R$)
3390 IF ASC(MID$(R$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 3410
3400 H=2
3410 HL(I,J)=VAL(LEFT$(R$,H))
3420 HH(I,J)=VAL(RIGHT$(R$,MH-H-1))
3430 INPUT "MEZEK REZONANCIAINTEGRALJA:";BE(HL(I,J),HH(I,J))
3440 IF HM=1 THEN NEXT J

```



```
3450 NEXT I
3460 PRINT "J"
3470 PRINT "    RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI:"
3480 PRINT "        ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
3490 FOR I=1 TO 500 : NEXT I
3500 PRINT : PRINT
3510 IF D=0 THEN 4010
3520 PRINT "    VAN-E 1-NEL TÖBB HELYEN KAPCSOLODO "
3530 PRINT "        DONOR CSOPORT?"
3540 PRINT : PRINT
3550 PRINT "        SÍGEN VAGY NEM?"
3560 GET A$: IF A$="" THEN 3560
3570 IF A$="N" THEN HM=0 : PRINT "J" : GOTO 3720
3580 IF A$<>"I" THEN PRINT "TTTTT" : GOTO 3520
3590 PRINT "J"
3600 PRINT "    RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
3610 PRINT "        ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
3620 PRINT : PRINT
3630 HM=1
3640 PRINT "A DONOR HANY HELYEN KAPCSOLODIK"
3650 PRINT "MASIK RESZRENDSZERHEZ?"
3660 PRINT
3670 FOR I=1 TO D
3680 PRINT : PRINT
3690 PRINT I;"-IK DONOR:"
3700 INPUT "TÖBB HELYEN KAPCSOLODIK";AC(I+A)
3710 NEXT I
3720 PRINT "J"
3730 PRINT "    RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI"
3740 PRINT "        ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:"
3750 PRINT
3760 PRINT "    (KAPCS. MEGADASI FORMATUMA PL: 2-14)"
3770 PRINT : PRINT
3780 IF BE=1 THEN PRINT "    1. SOROZAT:"
3790 PRINT
3800 FOR I=1 TO D
3810 PRINT : PRINT
3820 IF HM=0 THEN AC(I+A)=1 : J=1 : GOTO 3870
3830 FOR J=1 TO AC(I+A)
3840 R$=""
3850 IF J<>1 THEN PRINT : INPUT "    KÖVETKEZŐ KAPCSOLODÁS    ";R$ : GOTO 3910
3860 PRINT
3870 R$=""
3880 PRINT I;"-IK DONOR--KAPCSOLODO RESZRENDSZER:"
3890 PRINT
3900 INPUT "    KAPCSOLODO ATOMJAI    ";R$
3910 IF LEN(R$)<3 THEN 3900
3920 IF ASC(MID$(R$,2,1))>45 AND ASC(MID$(R$,3,1))>45 THEN 3900
3930 MH=LEN(R$)
3940 IF ASC(MID$(R$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 3960
3950 H=2
3960 HL(I+A,J)=VAL(LEFT$(R$,H))
3970 HH(I+A,J)=VAL(RIGHT$(R$,MH-H-1))
3980 INPUT "EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:";BE(HL(I+A,J),HH(I+A,J))
3990 IF HM=1 THEN NEXT J
4000 NEXT I
4010 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
4020 PRINT "    ADATOK RENDBEN? SÍGEN VAGY NEM?"
4030 GET A$: IF A$="" THEN 4030
4040 IF A$="N" THEN 2690
4050 IF A$="I" THEN 4070
4060 GOTO 4020
4070 IF BE=0 THEN 4410
4080 PRINT "REZONANCIAINTEGRAL VARIÁCIÓ:"
4090 PRINT
4100 PRINT "    1. SOROZAT (EMLEKEZTETŐ):"
4110 PRINT
```



```

4120 M=0
4130 FOR I=1 TO A+D
4140 FOR J=1 TO AC(I)
4150 PRINT "BETA(";HL(I,J);"-";HH(I,J);")";TAB(17);"=" ";BE(HL(I,J),HH(I,J))
4160 M=M+1
4170 NEXT J : NEXT I
4180 MD=M*SO
4190 DIM BS(MD)
4200 M=1
4210 FOR LK=2 TO SO+1
4220 PRINT : PRINT
4230 PRINT LK;" SOROZAT:"
4240 PRINT
4250 FOR I=1 TO A+D
4260 FOR J=1 TO AC(I)
4270 PRINT "BETA(";HL(I,J);"-";HH(I,J);")";TAB(17);"="
4280 INPUT " ";BS(M)
4290 M=M+1
4300 NEXT J : NEXT I : NEXT LK
4310 PRINT : PRINT
4320 PRINT " ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM"
4330 PRINT " FIGYELMEZTETES!!!"
4340 PRINT " N E M VALASZ ESETEN AZ ADATBEVITEL"
4350 PRINT " LEGELÖLRÖL KEZDŐDIK!!!"
4360 GET A$: IF A$="" THEN 4360
4370 IF A$="I" THEN 4410
4380 IF A$="N" THEN RUN
4390 PRINT "ADATOK RENDBEN? IGEN VAGY NEM"
4400 GOTO 4360
4410 PRINT "I"
4420 PRINT " ALAPALLAPOTOK MOLEKULAPALYAINAK ATOMI"
4430 PRINT " PALYAKOEFFICIENSEI (LCAO) :"
4440 PRINT
4450 M=BN
4460 PRINT
4470 PRINT "ALAPMOLEKULA LCAO KOEFFICIENSEI:"
4480 FOR K=1 TO M
4490 U(K)=M
4500 T(K)=1
4510 PRINT
4520 PRINT K;"-IK MOLEKULAPALYA:"
4530 FOR J=1 TO M
4540 PRINT " ";J;"II. ATOM:"
4550 INPUT " ";C(K,J)
4560 NEXT J
4570 NEXT K
4580 PRINT
4590 H=BN+1
4600 IF A=0 THEN 4780
4610 FOR I=1 TO A
4620 PRINT
4630 PRINT I;"-IK AKCEPTOR LCAO KOEFFICIENSEI:"
4640 FOR K=M+1 TO M+AN(I)
4650 U(K)=AN(I)
4660 T(K)=H
4670 PRINT
4680 PRINT K;"-IK MOLEKULAPALYA:"
4690 FOR J=M+1 TO M+AN(I)
4700 PRINT " ";J;"II. ATOM:"
4710 INPUT " ";C(K,J)
4720 NEXT J
4730 NEXT K
4740 M=M+AN(I)
4750 H=H+AN(I)
4760 NEXT I
4770 PRINT
4780 IF D=0 THEN 4950

```



```
4790 FOR I=1 TO D
4800 PRINT
4810 PRINT I; "-IK DONOR LCAO KOEFFICIENSEI:"
4820 FOR K=M+1 TO M+DN(I)
4830 U(K)=DN(I)
4840 T(K)=H
4850 PRINT
4860 PRINT K; "-IK MOLEKULAPALYA:"
4870 FOR J=M+1 TO M+DN(I)
4880 PRINT "      "; J; "II. ATOM:"
4890 INPUT "XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX"; C(K,J)
4900 NEXT J
4910 NEXT K
4920 M=M+DN(I)
4930 H=M+DN(I)
4940 NEXT I
4950 PRINT
4960 PRINT "      ADATOK RENDBEN? NIISEN VAGY ANEMM"
4970 GET A$: IF A$="" THEN 4970
4980 IF A$="N" THEN 4410
4990 IF A$="I" THEN 5010
5000 GOTO 4960
5010 PRINT "I"
5020 PRINT "GERJESZTETT ALLAPOTOK ATMENETI ENERGIAI"
5030 PRINT "      ES HULLAMFUGGVENYEI:"
5040 PRINT
5050 PRINT "      (KILEPES: E=0 ILL. KOEFF.=0 -VALI)"
5060 PRINT "      ATMENET MEGADASI FORMATUMA:"
5070 PRINT "      ALAP-GERJESZTETT MO SORSZAM (PL: 2-5)"
5080 PRINT : PRINT
5090 KB=1
5100 PRINT "ALAPMOLEKULA:"
5110 PRINT
5120 M=1
5130 PRINT M; ":"
5140 E=0
5150 INPUT "XXXXXXXXXXE(EV):"; E
5160 IF E=0 THEN 5390
5170 ED(M)=E
5180 J=1
5190 P=0
5200 INPUT "XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXKOEFFICIENS :"; P
5210 IF P=0 THEN 5350
5220 BK(M)=J
5230 P(M,J)=P
5240 P$=""
5250 INPUT "XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXATMENET      :"; P$
5260 IF LEN(P$)<3 THEN 5250
5270 IF ASC(MID$(P$,2,1))>45 AND ASC(MID$(P$,3,1))>45 THEN 5250
5280 MH=LEN(P$)
5290 IF ASC(MID$(P$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 5310
5300 H=2
5310 PL(M,J)=VAL(LEFT$(P$,H))
5320 PH(M,J)=VAL(RIGHT$(P$,MH-H-1))
5330 J=J+1
5340 GOTO 5190
5350 PRINT "I"
5360 IF BK(M)>KB THEN KB=BK(M)
5370 M=M+1
5380 GOTO 5130
5390 BT=M-1
5400 PRINT "I"
5410 PRINT
5420 IF A=0 THEN 5800
5430 AT=0
5440 FOR I=1 TO A
5450 AT(I)=0
```



```

5460 PRINT : PRINT
5470 PRINT I; "-IK AKCEPTOR:"
5480 PRINT
5490 PRINT M; ":"
5500 E=0
5510 INPUT "DODDDE(EV):"; E
5520 IF E=0 THEN 5760
5530 ED(M)=E
5540 J=1
5550 P=0
5560 INPUT "DODDDEKOEFFICIENS :"; P
5570 IF P=0 THEN 5710
5580 BK(M)=J
5590 P(M,J)=P
5600 P$=""
5610 INPUT "DODDDERTMENET :"; P$
5620 IF LEN(P$)<3 THEN 5610
5630 IF ASC(MID$(P$,2,1))>45 AND ASC(MID$(P$,3,1))>45 THEN 5610
5640 MH=LEN(P$)
5650 IF ASC(MID$(P$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 5670
5660 H=2
5670 PL(M,J)=VAL(LEFT$(P$,H))
5680 PH(M,J)=VAL(RIGHT$(P$,MH-H-1))
5690 J=J+1
5700 GOTO 5550
5710 PRINT " "
5720 AT(I)=AT(I)+1
5730 IF BK(M)>KB THEN KB=BK(M)
5740 M=M+1
5750 GOTO 5490
5760 PRINT " "
5770 AT=AT+AT(I)
5780 NEXT I
5790 PRINT
5800 IF D=0 THEN 6180
5810 DT=0
5820 FOR I=1 TO D
5830 DT(I)=0
5840 PRINT : PRINT
5850 PRINT I; "-IK DONOR:"
5860 PRINT
5870 PRINT M; ":"
5880 E=0
5890 INPUT "DODDDE(EV):"; E
5900 IF E=0 THEN 6140
5910 ED(M)=E
5920 J=1
5930 P=0
5940 INPUT "DODDDEKOEFFICIENS :"; P
5950 IF P=0 THEN 6090
5960 BK(M)=J
5970 P(M,J)=P
5980 P$=""
5990 INPUT "DODDDERTMENET :"; P$
6000 IF LEN(P$)<3 THEN 5990
6010 IF ASC(MID$(P$,2,1))>45 AND ASC(MID$(P$,3,1))>45 THEN 5990
6020 MH=LEN(P$)
6030 IF ASC(MID$(P$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 6050
6040 H=2
6050 PL(M,J)=VAL(LEFT$(P$,H))
6060 PH(M,J)=VAL(RIGHT$(P$,MH-H-1))
6070 J=J+1
6080 GOTO 5930
6090 PRINT " "
6100 DT(I)=DT(I)+1
6110 IF BK(M)>KB THEN KB=BK(M)
6120 M=M+1

```



```

6130 GOTO 5870
6140 PRINT "J"
6150 DT=DT+DT(I)
6160 NEXT I
6170 OT=BT+AT+DT
6180 PRINT
6190 PRINT "      ADATOK RENDBEN? MIBEN VAGY ANEMM"
6200 GET A$: IF A$="" THEN 6200
6210 IF A$="N" THEN 5010
6220 IF A$="I" THEN 6240
6230 GOTO 6190
6240 HM=M
6250 PRINT "J"
6260 PRINT "      CT ATMENETEK"
6270 PRINT
6280 PRINT "      (KILEPES: ATMENET=0 -VALI)"
6290 PRINT "      ATMENET MEGADASI FORMATUMA:"
6300 PRINT " ALAP-GERJESZTETT MO SORSZAM (PL: 10-4)"
6310 PRINT
6320 M=HM
6330 IF A=0 THEN 6570
6340 FOR I=1 TO A
6350 BA(I)=0
6360 PRINT
6370 PRINT "ALAPMOLEKULA :";I;"II-IK AKCEPTOR KOZTI CT"
6380 PRINT
6390 C$=""
6400 INPUT "ATMENET :";C$
6410 IF C$="0" THEN 6530
6420 IF LEN(C$)<3 THEN 6400
6430 IF ASC(MID$(C$,2,1))<>45 AND ASC(MID$(C$,3,1))<>45 THEN 6400
6440 MH=LEN(C$)
6450 IF ASC(MID$(C$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 6470
6460 H=2
6470 CL(M)=VAL(LEFT$(C$,H))
6480 CH(M)=VAL(RIGHT$(C$,MH-H-1))
6490 S(M)=IB-A(I)
6500 BA(I)=BA(I)+1
6510 M=M+1
6520 GOTO 6390
6530 PRINT "J"
6540 PRINT
6550 NEXT I
6560 PRINT
6570 IF D=0 THEN 7050
6580 FOR I=1 TO D
6590 DB(I)=0
6600 PRINT
6610 PRINT I;"II-IK DONOR : ALAPMOLEKULA KOZTI CT"
6620 PRINT
6630 C$=""
6640 INPUT "ATMENET :";C$
6650 IF C$="0" THEN 6770
6660 IF LEN(C$)<3 THEN 6640
6670 IF ASC(MID$(C$,2,1))<>45 AND ASC(MID$(C$,3,1))<>45 THEN 6640
6680 MH=LEN(C$)
6690 IF ASC(MID$(C$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 6710
6700 H=2
6710 CL(M)=VAL(LEFT$(C$,H))
6720 CH(M)=VAL(RIGHT$(C$,MH-H-1))
6730 S(M)=I(I)-AB
6740 DB(I)=DB(I)+1
6750 M=M+1
6760 GOTO 6630
6770 PRINT "J"
6780 PRINT
6790 NEXT I

```



```
6800 PRINT
6810 IF A=0 OR D=0 THEN 7050
6820 FOR I=1 TO D
6830 FOR J=1 TO A
6840 DA(I,J)=0
6850 PRINT I;"II-IK DONOR :";J;"II-IK AKCEPTOR KOZTI CT"
6860 PRINT
6870 C$=""
6880 INPUT "ATMENET :";C$
6890 IF C$="0" THEN 7010
6900 IF LEN(C$)<3 THEN 6880
6910 IF ASC(MID$(C$,2,1))>45 AND ASC(MID$(C$,3,1))>45 THEN 6880
6920 MH=LEN(C$)
6930 IF ASC(MID$(C$,2,1))=45 THEN H=1 : GOTO 6950
6940 H=2
6950 CL(M)=VAL(LEFT$(C$,H))
6960 CH(M)=VAL(RIGHT$(C$,MH-H-1))
6970 S(M)=I(I)-A(J)
6980 DA(I,J)=DA(I,J)+1
6990 M=M+1
7000 GOTO 6870
7010 PRINT "I"
7020 PRINT
7030 NEXT J
7040 NEXT I
7050 N=M-1
7060 PRINT "ADATOK RENDBEN? NINEN VAGY NEM?"
7070 GET A$: IF A$="" THEN 7070
7080 IF A$="N" THEN 6250
7090 IF A$="I" THEN 7110
7100 GOTO 7060
7110 PRINT "I"
7120 PRINT "π-CENTRUMOK VEGYERTEKALLAPOTU IONIZACIOS";
7130 PRINT "POTENCIALJAI ES ELEKTRONAFFINITASAI (EV)"
7140 PRINT
7150 M=BN
7160 PRINT : PRINT
7170 PRINT "ALAPMOLEKULA:"
7180 PRINT
7190 FOR J=1 TO BN
7200 PRINT J;"II. CENTRUM:"
7210 INPUT "IP=";IV(J)
7220 INPUT "EA=";AV(J)
7230 PRINT
7240 NEXT J
7250 IF A=0 THEN 7390
7260 FOR I=1 TO A
7270 PRINT
7280 PRINT I;"-IK AKCEPTOR RESZRENDSZER:"
7290 PRINT
7300 FOR J=1 TO AN(I)
7310 PRINT M+J;"II. CENTRUM:"
7320 INPUT "IP=";IV(M+J)
7330 INPUT "EA=";AV(M+J)
7340 PRINT
7350 NEXT J
7360 M=M+AN(I)
7370 NEXT I
7380 PRINT
7390 IF D=0 THEN 7520
7400 FOR I=1 TO D
7410 PRINT
7420 PRINT I;"-IK DONOR RESZRENDSZER:"
7430 PRINT
7440 FOR J=1 TO DN(I)
7450 PRINT M+J;"II. CENTRUM:"
7460 INPUT "IP=";IV(M+J)
```



```
7470 INPUT "#####ER=";AV(M+J)
7480 PRINT
7490 NEXT J
7500 M=M+DN(I)
7510 NEXT I
7520 PRINT
7530 PRINT "      ADATOK RENDBEN? MIBEN VAGY ENEM?"
7540 GET A$: IF A$="" THEN 7540
7550 IF A$="N" THEN 7110
7560 IF A$="I" THEN 7580
7570 GOTO 7530
7580 PRINT "I"
7590 FOR I=1 TO PN
7600 FOR J=1 TO PN
7610 R(I,J)=SQR((X(I)-X(J))2+(Y(I)-Y(J))2+(Z(I)-Z(J))2)
7620 NEXT J
7630 NEXT I
7640 REM SZEKVENCIALIS ADATATVITEL
7650 REM "##### ADATATVITEL!"
7660 PRINT "##### ADATATVITEL!"
7670 OPEN 2,8,2,"@:ADAT,S,W"
7680 R$=CHR$(13)
7690 PRINT#2,M$;R$;B$
7700 PRINT#2,A;R$;D;R$;BN;R$;PN;R$;BE;R$;MA;R$;AM;R$;KB
7710 PRINT#2,PB;R$;CN;R$;BT;R$;AT;R$;DT;R$;OT;R$;N
7720 FOR J=1 TO BN
7730 PRINT#2,X(J);R$;Y(J);R$;Z(J);R$;IV(J);R$;AV(J);R$;U(J);R$;T(J);R$;
7740 NEXT J
7750 M=BN
7760 FOR K=1 TO M
7770 FOR J=1 TO M
7780 PRINT#2,C(K,J);R$;
7790 NEXT J
7800 NEXT K
7810 IF A=0 THEN 7970
7820 PRINT#2,IB
7830 FOR I=1 TO A
7840 PRINT#2,A$(I);R$;
7850 PRINT#2,AN(I);R$;A(I);R$;PA(I);R$;AT(I);R$;BA(I);R$;
7860 FOR J=1 TO AN(I)
7870 PRINT#2,X(M+J);R$;Y(M+J);R$;Z(M+J);R$;IV(M+J);R$;AV(M+J);R$;
7880 PRINT#2,U(M+J);R$;T(M+J);R$;
7890 NEXT J
7900 FOR K=M+1 TO M+AN(I)
7910 FOR J=M+1 TO M+AN(I)
7920 PRINT#2,C(K,J);R$;
7930 NEXT J
7940 NEXT K
7950 M=M+AN(I)
7960 NEXT I
7970 IF D=0 THEN 8130
7980 PRINT#2,AB
7990 FOR I=1 TO D
8000 PRINT#2,D$(I);R$;
8010 PRINT#2,DN(I);R$;I(I);R$;PD(I);R$;DT(I);R$;DB(I);R$;
8020 FOR J=1 TO DN(I)
8030 PRINT#2,X(M+J);R$;Y(M+J);R$;Z(M+J);R$;IV(M+J);R$;AV(M+J);R$;
8040 PRINT#2,U(M+J);R$;T(M+J);R$;
8050 NEXT J
8060 FOR K=M+1 TO M+DN(I)
8070 FOR J=M+1 TO M+DN(I)
8080 PRINT#2,C(K,J);R$;
8090 NEXT J
8100 NEXT K
8110 M=M+DN(I)
8120 NEXT I
8130 FOR I=1 TO OT
```



```
8140 PRINT#2,ED(I);R$;BK(I);R$;
8150 FOR J=1 TO BK(I)
8160 PRINT#2,P(I,J);R$;PL(I,J);R$;PH(I,J);R$;
8170 NEXT J
8180 NEXT I
8190 FOR I=OT+1 TO N
8200 PRINT#2,CL(I);R$;CH(I);R$;S(I);R$;
8210 NEXT I
8220 FOR I=1 TO PN
8230 FOR J=1 TO PN
8240 PRINT#2,R(I,J);R$;
8250 NEXT J
8260 NEXT I
8270 FOR I=1 TO D
8280 FOR J=1 TO A
8290 PRINT#2,DA(I,J);R$;
8300 NEXT J
8310 NEXT I
8320 FOR I=1 TO A+D
8330 PRINT#2,AC(I);R$;
8340 FOR J=1 TO AC(I)
8350 PRINT#2,HL(I,J);R$;HH(I,J);R$;BE(HL(I,J),HH(I,J));R$;
8360 NEXT J
8370 NEXT I
8380 IF BE=0 THEN 8430
8390 PRINT#2,MD;R$;SD
8400 FOR I=1 TO MD
8410 PRINT#2,BS(I);R$;
8420 NEXT I
8430 CLOSE 2
8440 LOAD "PRINT",8
```

READY.











```
1440 M=BN
1450 PRINT : PRINT
1460 IF A=0 THEN 1570
1470 FOR I=1 TO A
1480 PRINT A$(I)
1490 FOR J=1 TO AN(I)
1500 PRINT CHR$(16);"03";J+M;CHR$(16);"15";X(J+M);CHR$(16);"25";Y(J+M);
1510 PRINT CHR$(16);"35";Z(J+M);CHR$(16);"53";IV(J+M);CHR$(16);"63";AV(J+M)
1520 NEXT J
1530 M=M+AN(I)
1540 PRINT
1550 NEXT I
1560 PRINT
1570 IF D=0 THEN 1670
1580 FOR I=1 TO D
1590 PRINT D$(I)
1600 FOR J=1 TO DN(I)
1610 PRINT CHR$(16);"03";J+M;CHR$(16);"15";X(J+M);CHR$(16);"25";Y(J+M);
1620 PRINT CHR$(16);"35";Z(J+M);CHR$(16);"53";IV(J+M);CHR$(16);"63";AV(J+M)
1630 NEXT J
1640 M=M+DN(I)
1650 PRINT
1660 NEXT I
1670 PRINT : PRINT : PRINT
1680 PRINT "RESZRENDSZEREK  $\pi$ -CENTRUMSZÁMA ( $\pi$ -C) ES  $\pi$ -ELEKTRONSZÁMA ( $\pi$ -E):"
1690 PRINT "-----"
1700 PRINT : PRINT
1710 PRINT CHR$(16);"15" $\pi$ -C  $\pi$ -E"
1720 PRINT CHR$(16);"15"-----"
1730 PRINT
1740 PRINT BM$;CHR$(16);"15";BN;CHR$(16);"24";PB
1750 PRINT
1760 IF A=0 THEN 1810
1770 FOR I=1 TO A
1780 PRINT A$(I);CHR$(16);"15";AN(I);CHR$(16);"24";PA(I)
1790 NEXT I
1800 PRINT
1810 IF D=0 THEN 1850
1820 FOR I=1 TO D
1830 PRINT D$(I);CHR$(16);"15";DN(I);CHR$(16);"24";PD(I)
1840 NEXT I
1850 PRINT : PRINT : PRINT
1860 PRINT "RESZRENDSZEREK KAPCSOLODÓ ATOMPARJAI ES EZEK REZONANCIAINTEGRÁLJA:"
1870 PRINT "-----"
1880 PRINT
1890 IF BE=1 THEN PRINT " 1. SOROZAT:"
1900 PRINT "-----"
1910 PRINT
1920 IF A=0 THEN 2030
1930 FOR I=1 TO A
1940 PRINT A$(I);
1950 FOR J=1 TO AC(I)
1960 PRINT CHR$(16);"15";HL(I,J);"-";HH(I,J);
1970 PRINT CHR$(16);"30BETA (";MID$(STR$(HL(I,J)),2,4);" -";STR$(HH(I,J));")";
1980 PRINT CHR$(16);"45";"=" ;BE(HL(I,J),HH(I,J))
1990 NEXT J
2000 PRINT
2010 NEXT I
2020 PRINT
2030 IF D=0 THEN 2140
2040 FOR I=1 TO D
2050 PRINT D$(I);
2060 FOR J=1 TO AC(I+A)
2070 PRINT CHR$(16);"15";HL(I+A,J);"-";HH(I+A,J);
2080 PRINT CHR$(16);"30BETA (";MID$(STR$(HL(I+A,J)),2,4);" -";
2090 PRINT STR$(HH(I+A,J));")";
2100 PRINT CHR$(16);"45";"=" ;BE(HL(I+A,J),HH(I+A,J))
```



```
2110 NEXT J
2120 PRINT
2130 NEXT I
2140 PRINT : PRINT : PRINT
2150 PRINT "RESZRENDSZEREK LOKALISAN GERJESZTETT ALLAPOTAINAK ";
2160 PRINT "ENERGIAI ES HULLAMFUGGVENYEI:";
2170 PRINT "-----";
2180 PRINT "-----"
2190 PRINT
2200 PRINT "      NO          E(EV)      HULLAMFUGGVENY"
2210 PRINT "-----"
2220 PRINT
2230 PRINT BM$
2240 IF BT=0 THEN 2380
2250 FOR K=1 TO BT
2260 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"15";ED(K);CHR$(16);"25";
2270 J=1
2280 IF P(K,J)=0 THEN 2360
2290 IF J=1 THEN A$="" : GOTO 2320
2300 IF P(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 2320
2310 A$=" - "
2320 PRINT A$;MID$(STR$(P(K,J)),2,5);"(";MID$(STR$(PL(K,J)),2,4);"-";
2330 PRINT MID$(STR$(PH(K,J)),2,4);")";
2340 J=J+1
2350 GOTO 2280
2360 PRINT
2370 NEXT K
2380 M=BT
2390 PRINT
2400 IF A=0 THEN 2600
2410 FOR I=1 TO A
2420 PRINT A$(I)
2430 IF AT(I)=0 THEN 2570
2440 FOR K=M+1 TO M+AT(I)
2450 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"15";ED(K);CHR$(16);"25";
2460 J=1
2470 IF P(K,J)=0 THEN 2550
2480 IF J=1 THEN A$="" : GOTO 2510
2490 IF P(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 2510
2500 A$=" - "
2510 PRINT A$;MID$(STR$(P(K,J)),2,5);"(";MID$(STR$(PL(K,J)),2,4);"-";
2520 PRINT MID$(STR$(PH(K,J)),2,4);")";
2530 J=J+1
2540 GOTO 2470
2550 PRINT
2560 NEXT K
2570 M=M+AT(I)
2580 NEXT I
2590 PRINT
2600 IF D=0 THEN 2790
2610 FOR I=1 TO D
2620 PRINT D$(I)
2630 IF DT(I)=0 THEN 2770
2640 FOR K=M+1 TO M+DT(I)
2650 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"15";ED(K);CHR$(16);"25";
2660 J=1
2670 IF P(K,J)=0 THEN 2750
2680 IF J=1 THEN A$="" : GOTO 2710
2690 IF P(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 2710
2700 A$=" - "
2710 PRINT A$;MID$(STR$(P(K,J)),2,5);"(";MID$(STR$(PL(K,J)),2,4);"-";
2720 PRINT MID$(STR$(PH(K,J)),2,4);")";
2730 J=J+1
2740 GOTO 2670
2750 PRINT
2760 NEXT K
2770 M=M+DT(I)
```



```
2780 NEXT I
2790 PRINT : PRINT : PRINT
2800 PRINT "FIGYELEMBEVETT CT ATMENETEK:"
2810 PRINT "-----"
2820 PRINT
2830 M=0
2840 IF A=0 THEN 2940
2850 FOR I=1 TO A
2860 PRINT BM$;" : ";A$(I);";";CHR$(16);"26";
2870 FOR J=M+1 TO M+BA(I)
2880 PRINT CL(J);"-";CH(J);" ";
2890 NEXT J
2900 M=M+BA(I)
2910 PRINT
2920 NEXT I
2930 PRINT
2940 IF D=0 THEN 3160
2950 FOR I=1 TO D
2960 PRINT D$(I);" : ";BM$;";";CHR$(16);"26";
2970 FOR J=M+1 TO M+DB(I)
2980 PRINT CL(J);"-";CH(J);" ";
2990 NEXT J
3000 M=M+DB(I)
3010 PRINT
3020 NEXT I
3030 PRINT
3040 IF D=0 OR A=0 THEN 3160
3050 FOR I=1 TO D
3060 FOR J=1 TO A
3070 PRINT D$(I);" : ";A$(J);";";CHR$(16);"26";
3080 FOR K=M+1 TO M+DA(I,J)
3090 PRINT CL(K);"-";CH(K);" ";
3100 NEXT K
3110 M=M+DA(I,J)
3120 PRINT
3130 NEXT J
3140 PRINT
3150 NEXT I
3160 PRINT : PRINT : PRINT
3170 PRINT "RESZRENDSZEREK MOLEKULAPALYAINAK ATOMI PALYAKOEFFICIENSEI:"
3180 PRINT "-----"
3190 PRINT
3200 M=BN
3210 PRINT "MOL.PALYA  ATOMI PALYAKOEFFICIENSEK"
3220 PRINT "-----"
3230 PRINT
3240 PRINT BM$
3250 FOR K=1 TO M
3260 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"10";
3270 FOR J=1 TO M
3280 IF J=1 AND C(K,J)<0 THEN A$="-" : GOTO 3320
3290 IF J=1 THEN A$=" " : GOTO 3320
3300 IF C(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 3320
3310 A$=" - "
3320 PRINT A$;MID$(STR$(C(K,J)),2,6);"(";MID$(STR$(J),2,3);")";
3330 NEXT J
3340 PRINT
3350 NEXT K
3360 PRINT
3370 IF A=0 THEN 3540
3380 FOR I=1 TO A
3390 PRINT A$(I)
3400 FOR K=M+1 TO M+AN(I)
3410 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"10";
3420 FOR J=M+1 TO M+AN(I)
3430 IF J=M+1 AND C(K,J)<0 THEN A$="-" : GOTO 3470
3440 IF J=M+1 THEN A$=" " : GOTO 3470
```



```
3450 IF C(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 3470
3460 A$=" - "
3470 PRINT A$;MID$(STR$(C(K,J)),2,6);"(";MID$(STR$(J),2,3);")";
3480 NEXT J
3490 PRINT
3500 NEXT K
3510 M=M+DN(I)
3520 NEXT I
3530 PRINT
3540 IF D=0 THEN 3700
3550 FOR I=1 TO D
3560 PRINT D$(I)
3570 FOR K=M+1 TO M+DN(I)
3580 PRINT CHR$(16);"03";K;CHR$(16);"10";
3590 FOR J=M+1 TO M+DN(I)
3600 IF J=M+1 AND C(K,J)<0 THEN A$="-" : GOTO 3640
3610 IF J=M+1 THEN A$=" " : GOTO 3640
3620 IF C(K,J)>0 THEN A$=" + " : GOTO 3640
3630 A$=" - "
3640 PRINT A$;MID$(STR$(C(K,J)),2,6);"(";MID$(STR$(J),2,3);")";
3650 NEXT J
3660 PRINT
3670 NEXT K
3680 M=M+DN(I)
3690 NEXT I
3700 PRINT : PRINT : PRINT
3710 PRINT "CENTRUMOK KOZTI TAVOLSAG MATRIX:"
3720 PRINT "-----"
3730 PRINT
3740 DI=7
3750 NM=INT(PN/DI)
3760 IF NM<1 THEN 4020
3770 FOR K=1 TO NM
3780 U=8
3790 PRINT " ";
3800 FOR I=DI*K-DI+1 TO DI*K
3810 IF I<10 THEN PRINT " " ; I ; : GOTO 3840
3820 PRINT " " ;
3830 PRINT " " ; I ;
3840 NEXT I
3850 PRINT
3860 FOR I=1 TO PN
3870 PRINT
3880 U=3
3890 XX=I
3900 GOSUB 4490
3910 PRINT XX$;" ";
3920 U=8
3930 FOR J=DI*K-DI+1 TO DI*K
3940 XX=R(I,J)
3950 GOSUB 4490
3960 PRINT XX$;" ";
3970 NEXT J : NEXT I
3980 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
3990 NEXT K
4000 IF PN/DI=INT(PN/DI) THEN 4200
4010 PRINT " ";
4020 FOR I=DI*NM+1 TO PN
4030 IF I<10 THEN PRINT " " ; I ; : GOTO 3840
4040 PRINT " " ;
4050 PRINT " " ; I ;
4060 NEXT I
4070 PRINT
4080 FOR I=1 TO PN
4090 PRINT
4100 U=3
4110 XX=I
```







```
4790 REM PROGRAMVEGE MUTATO ATALLITASA ES A KORABBI VALTOZOK TÖRLESE:
4800 REM "
4810 REM CELJA: PROGRAMVEG MUTATO ATALLITASA A BEHIVO (MIM) PROGRAMNAK MEG-
4820 REM FELELO ERTEKRÖL A LOAD-AL BEHIVOTT (PRINT-1) PROGRAMNAK MEGFELELÖRE!
4830 REM (ATALLITAS NELKUL A BEHIVO PROGRAM VEGMUTATOJA ATADODIK A LOAD-AL
4840 REM BEHIVOTT PROGRAMNAK! -- ENNEK KÖVETKEZMENYEI:
4850 REM 1. HOSSZABB BEHIVO PROGRAM ESETEN AZ EREDETI FELESLEGESEN NAGY BASIC
4860 REM TERULETFOGLALAS MARAD MEG!
4870 REM 2. RÖVIDEBB BEHIVO PROGRAM ESETEN A BEHIVOTT PROGRAM VEGE "ATLOG" A
4880 REM VALTOZOK TERULETERE ES A PROGRAMVEZERLES "ELTEVED"!
4890 REM
4900 REM A PROGRAM BARMELY MODOSITASA ESETEN A PROGRAMVEG MUTATOT ATALLITANI!!!!
4910 REM PROGRAMVEG MUTATO ATALLITASANAK 5 LEPESE:
4920 REM "
4930 REM 1. PRINT-1 PROGRAM BEOLVASASA!
4940 REM 2. RUN 5020
4950 REM 3. RETURN BILLENTYUVEL ELFOGADTATNI AZ UTASITAS HATASARA KIIRT SORT!
4960 REM 4. RUN 5020 (EZ AZ ITERACIO AZ ELÖZÖ UTASITASHOSSZAL KORRIGAL!)
4970 REM 5. LASD 3.
4980 REM
4990 REM AZ 5020 SOR RUN UTASITASA A VALTOZOK KORABBI ERTEKET TÖRLI ES EGYUTTAL
5000 REM VISSZAALLITJA A DATA MUTATOT AZ UJ PROGRAM VEGERE!
5010 REM
5020 PRINT "100 POKE 45,";PEEK(45));": POKE 46,";PEEK(46));": RUN 110"
```



```

100 POKE 45, 64 : POKE 46, 54 : RUN 110
110 REM
120 REM SAJATERTEK-SAJATVEKTOR-OSZCILLATORERŐSSEG SZAMITAS:
130 REM "-----"
140 REM PROGRAMNEV: CALC
150 REM "-----"
160 REM
170 PRINT "-----" ADATATVETEL!"
180 OPEN 2,8,2,"@0:ADAT,S,R"
190 R$=CHR$(13)
200 INPUT#2,MM$,BM$
210 INPUT#2,A,D,BN,PN,BE,MA,AM,KB,PB,CN,BT,AT,DT,OT,N
220 DIM AN(A),DN(D),A(A),I(D),AT(A),DT(D),PA(A),PD(D),BA(A),DB(D),DA(D,A)
230 DIM AC(A+D),X(PN),Y(PN),Z(PN),IV(PN),AV(PN),U(PN),T(PN),BK(N),ED(N),S(N)
240 DIM R(PN,PN),C(PN,PN),P(N,KB),BE(PN,PN)
250 DIM HL(A+D,3*AM),HH(A+D,3*AM),PL(N,KB),PH(N,KB),CL(N),CH(N)
260 DIM GA(PN,PN),E(N,N),DE(N+1,N+1),QE(N+1),QB(N+1)
270 DIM AX(N),AY(N),AZ(N),AM(N),OS(N)
280 FOR J=1 TO BN
290 INPUT#2,X(J),Y(J),Z(J),IV(J),AV(J),U(J),T(J)
300 NEXT J
310 M=BN
320 FOR K=1 TO M
330 FOR J=1 TO M
340 INPUT#2,C(K,J)
350 NEXT J
360 NEXT K
370 IF A=0 THEN 520
380 INPUT#2,IB
390 FOR I=1 TO A
400 INPUT#2,A$(I)
410 INPUT#2,AN(I),A(I),PA(I),AT(I),BA(I)
420 FOR J=1 TO AN(I)
430 INPUT#2,X(M+J),Y(M+J),Z(M+J),IV(M+J),AV(M+J),U(M+J),T(M+J)
440 NEXT J
450 FOR K=M+1 TO M+AN(I)
460 FOR J=M+1 TO M+AN(I)
470 INPUT#2,C(K,J)
480 NEXT J
490 NEXT K
500 M=M+AN(I)
510 NEXT I
520 IF D=0 THEN 670
530 INPUT#2,AB
540 FOR I=1 TO D
550 INPUT#2,D$(I)
560 INPUT#2,DN(I),I(I),PD(I),DT(I),DB(I)
570 FOR J=1 TO DN(I)
580 INPUT#2,X(M+J),Y(M+J),Z(M+J),IV(M+J),AV(M+J),U(M+J),T(M+J)
590 NEXT J
600 FOR K=M+1 TO M+DN(I)
610 FOR J=M+1 TO M+DN(I)
620 INPUT#2,C(K,J)
630 NEXT J
640 NEXT K
650 M=M+DN(I)
660 NEXT I
670 FOR I=1 TO OT
680 INPUT#2,ED(I),BK(I)
690 E(I,I)=ED(I)
700 FOR J=1 TO BK(I)
710 INPUT#2,P(I,J),PL(I,J),PH(I,J)
720 NEXT J
730 NEXT I
740 E(0,0)=0
750 FOR I=OT+1 TO N
760 INPUT#2,CL(I),CH(I),S(I)

```



```

770 NEXT I
780 FOR I=1 TO PN
790 FOR J=1 TO PN
800 INPUT#2,R(I,J)
810 NEXT J
820 NEXT I
830 FOR I=1 TO D
840 FOR J=1 TO A
850 INPUT#2,DA(I,J)
860 NEXT J
870 NEXT I
880 FOR I=1 TO A+D
890 INPUT#2,AC(I)
900 FOR J=1 TO AC(I)
910 INPUT#2,HL(I,J),HH(I,J),BE(HL(I,J),HH(I,J))
920 BE(HH(I,J),HL(I,J))=BE(HL(I,J),HH(I,J))
930 NEXT J
940 NEXT I
950 IF BE=0 THEN 1010
960 INPUT#2,MD,SO
970 DIM BS(MD)
980 FOR I=1 TO MD
990 INPUT#2,BS(I)
1000 NEXT I
1010 CLOSE 2
1020 PRINT "XXXXXXXXXXXX NE KAPCSOLD KI!"
1030 TI$="000000"
1040 ZZ=TI/3600
1050 PRINT "XXXXXXXXXXPROGRAMFUTAS ALLASA:"
1060 PRINT " "
1070 IF BE<>1 OR SO=0 THEN 1090
1080 PRINT " 1. SOROZAT:"
1090 PRINT "MATRIXELEMOK SZAMITASA:"
1100 REM KETCENTRUMOS TASZITASI INTEGRALOK:
1110 REM " "
1120 FOR I=1 TO PN-1
1130 FOR J=I+1 TO PN
1140 AA=2*14.399/(IV(I)-AV(I)+IV(J)-AV(J))
1150 GA(I,J)=14.399/(AA+R(I,J))
1160 GA(J,I)=GA(I,J)
1170 NEXT J
1180 NEXT I
1190 REM
1200 REM CT ENERGIAK
1210 REM " "
1220 FOR I=OT+1 TO N
1230 M=0
1240 FOR K=T(CL(I)) TO T(CL(I))+U(CL(I))-1
1250 FOR L=T(CH(I)) TO T(CH(I))+U(CH(I))-1
1260 M=M+C(CL(I),K)*C(CH(I),L)*GA(K,L)
1270 NEXT L
1280 NEXT K
1290 ED(I)=S(I)-M
1300 E(I,I)=ED(I)
1310 NEXT I
1320 REM CT ALLAPOTOK KOZTI KOLOCSONHATASI ELEMOK:
1330 REM " "
1340 K=OT
1350 TT=OT-1
1360 H=0
1370 IF A=0 THEN 1600
1380 REM ALAP--AKCEPTOR CT-K KOZTI ATMENETEK:
1390 REM " "
1400 FOR I=1 TO A
1410 IF BA(I)=0 THEN 1590
1420 M=0
1430 TT=TT+BA(I)

```



```
1440 IF BA(I)=1 THEN K=K+1 : GOTO 1570
1450 FOR K=K+1 TO TT
1460 FOR L=K+1 TO TT+1
1470 FOR K1=T(CL(K)) TO T(CL(K))+U(CL(K))-1
1480 FOR L1=T(CH(K)) TO T(CH(K))+U(CH(K))-1
1490 M=M+C(CL(K),K1)*C(CL(L),K1)*C(CH(K),L1)*C(CH(L),L1)*GA(K1,L1)
1500 NEXT L1
1510 NEXT K1
1520 E(K,L)=M
1530 IF CH(K)=CH(L) THEN E(K,L)=-E(K,L)
1540 E(L,K)=E(K,L)
1550 NEXT L
1560 NEXT K
1570 IF H=0 THEN 1590
1580 RETURN
1590 NEXT I
1600 IF D=0 THEN 1830
1610 H=1
1620 REM DONOR--ALAP CT-K KÖZTI ATMENETEK:
1630 REM "-----"
1640 FOR I=1 TO D
1650 IF DB(I)=0 THEN 1700
1660 M=0
1670 TT=TT+DB(I)
1680 IF DB(I)=1 THEN K=K+1 : GOTO 1700
1690 GOSUB 1450
1700 NEXT I
1710 IF A=0 OR D=0 THEN 1830
1720 REM DONOR--AKCEPTOR CT-K KÖZTI ATMENETEK:
1730 REM "-----"
1740 FOR I=1 TO D
1750 FOR J=1 TO A
1760 IF DA(I,J)=0 THEN 1810
1770 M=0
1780 TT=TT+DA(I,J)
1790 IF DA(I,J)=1 THEN K=K+1 : GOTO 1810
1800 GOSUB 1450
1810 NEXT J
1820 NEXT I
1830 REM REZONANCIA INTEGRALOK:
1840 REM "-----"
1850 IF BE=0 THEN 1960
1860 MM=1
1870 LK=1
1880 IF LK=1 THEN 1960
1890 FOR I=1 TO A+D
1900 FOR J=1 TO AC(I)
1910 BE(HL(I,J),HH(I,J))=BS(MM)
1920 BE(HH(I,J),HL(I,J))=BE(HL(I,J),HH(I,J))
1930 MM=MM+1
1940 NEXT J
1950 NEXT I
1960 H=0T
1970 IF A=0 THEN 2050
1980 FOR I=1 TO A
1990 IF BA(I)=0 THEN 2040
2000 FOR J=1 TO BA(I)
2010 ED(H+J)=H
2020 NEXT J
2030 H=H+BA(I)
2040 NEXT I
2050 IF D=0 THEN 2230
2060 FOR I=1 TO D
2070 IF DB(I)=0 THEN 2120
2080 FOR J=1 TO DB(I)
2090 ED(H+J)=H
2100 NEXT J
```



```

2110 H=H+DB(I)
2120 NEXT I
2130 IF A=0 OR D=0 THEN 2230
2140 FOR I=1 TO D
2150 FOR J=1 TO A
2160 IF DA(I,J)=0 THEN 2210
2170 FOR K=1 TO DA(I,J)
2180 ED(H+K)=H
2190 NEXT K
2200 H=H+DA(I,J)
2210 NEXT J
2220 NEXT I
2230 P(0,1)=1
2240 FOR K=0T+1 TO N
2250 BK(K)=1
2260 PL(K,1)=CL(K)
2270 PH(K,1)=CH(K)
2280 P(K,1)=1
2290 FOR L=0 TO ED(K)
2300 M=0
2310 IF L<>0 THEN : FI=0 : GOTO 2360
2320 Z1=CL(K)
2330 Z2=CH(K)
2340 H=SQR(2)
2350 FI=1 : I=1 : GOTO 2420
2360 FOR I=1 TO BK(L)
2370 IF CL(K)<>PL(L,I) AND CH(K)<>PH(L,I) THEN E(K,L)=0 : GOTO 2540
2380 IF CL(K)=PL(L,I) THEN Z1=CH(K) : Z2=PH(L,I) : H=1 : GOTO 2420
2390 Z1=CL(K)
2400 Z2=PL(L,I)
2410 H=-1
2420 FOR J1=T(Z1) TO T(Z1)+U(Z1)-1
2430 FOR J2=T(Z2) TO T(Z2)+U(Z2)-1
2440 FOR I1=1 TO A+D
2450 FOR I2=1 TO AC(I1)
2460 IF J1=HL(I1,I2) AND J2=HH(I1,I2) OR J1=HH(I1,I2) AND J2=HL(I1,I2) THEN 2480
2470 GOTO 2490
2480 M=M+P(L,I)*C(Z1,J1)*C(Z2,J2)*BE(J1,J2)*H : GOTO 2530
2490 NEXT I2
2500 NEXT I1
2510 NEXT J2
2520 NEXT J1
2530 IF FI=1 THEN 2550
2540 NEXT I
2550 E(K,L)=M
2560 E(L,K)=E(K,L)
2570 NEXT L
2580 NEXT K
2590 REM A KOLCSONHATASI MATRIX:
2600 REM "-----"
2610 FOR I=1 TO N+1
2620 FOR J=1 TO I
2630 DE(I,J)=E(I-1,J-1)
2640 DE(J,I)=DE(I,J)
2650 NEXT J
2660 NEXT I
2670 YY=TI/3600-ZZ
2680 ZZ=TI/3600
2690 PRINT "T";TAB(25);INT(YY+0.5);TAB(30);"PERC"
2700 PRINT "MATRIX DIAGONALIZACIO : "
2710 REM MATRIX DIAGONALIZACIO:
2720 REM "-----"
2730 N=N+1
2740 FORNM=2TON+1 : I=N+2-NM : L=I-2 : F=DE(I,I-1) : G=0 : IFL<=0 THEN 2760
2750 FORK=1TOL : G=G+DE(I,K)*DE(I,K) : NEXTK
2760 H=G+F*F : IF G-1E-10<>0 THEN 2780
2770 QB(I)=F : H=0 : GOTO 2890

```



```
2780 L=L+1:IFF<0THEN2800
2790 QB(I)=-SQR(H):G=QB(I):GOTO2810
2800 QB(I)=SQR(H):G=QB(I)
2810 H=H-F*G:DE(I,I-1)=F-G:F=0
2820 FORJ=1TOL:DE(J,I)=DE(I,J)/H:G=0
2830 FORK=1TOJ:G=G+DE(J,K)*DE(I,K):NEXTK
2840 IFJ+1-L<0THEN2860
2850 FORK=J+1TOL:G=G+DE(K,J)*DE(I,K):NEXTK
2860 QB(J)=G/H:F=F+G*DE(J,I):NEXTJ
2870 HH=F/(H+H):FORJ=1TOL:F=DE(I,J):QB(J)=QB(J)-HH*F:G=QB(J)
2880 FORK=1TOJ:DE(J,K)=DE(J,K)-F*QB(K)-G*DE(I,K):NEXTK:NEXTJ
2890 QE(I)=H:NEXTNM
2900 QE(1)=0:QB(1)=0:FORI=1TON:L=I-1:IFQE(I)=0THEN2940
2910 IFL<0THEN2940
2920 FORJ=1TOL:G=0:FORK=1TOL:G=G+DE(I,K)*DE(K,J):NEXTK
2930 FORK=1TOL:DE(K,J)=DE(K,J)-G*DE(K,I):NEXTK:NEXTJ
2940 QE(I)=DE(I,I):DE(I,I)=1:IFL<0THEN2960
2950 FORJ=1TOL:DE(I,J)=0:DE(J,I)=0:NEXTJ
2960 NEXTI
2970 FORI=2TON:QB(I-1)=QB(I):NEXTI
2980 F=0:B=0:QB(N)=0
2990 FORL=1TON:J=0:EP=1E-06:H=EP*(ABS(QE(L))+ABS(QB(L))):IFB-H<0THENB=H
3000 FORM=LTON:IFABS(QB(M))-B>0THENNEXTM
3010 IFM-L=0THEN3150
3020 IFJ-30=0THEN3240
3030 J=J+1:P=(QE(L+1)-QE(L))/(2*QB(L)):R=SQR(P*P+1):IFP>0THEN3050
3040 H=QE(L)-QB(L)/(P-R):GOTO3060
3050 H=QE(L)-QB(L)/(P+R)
3060 FORI=LTON:QE(I)=QE(I)-H:NEXTI
3070 F=F+H:P=QE(M):C=1:S=0:M1=M-1:IF M1-L<0THEN3140
3080 FORLM=LTONM1:I=L+M1-LM:G=C*QB(I):H=C*P:IFABS(P)-ABS(QB(I))<0THEN3100
3090 C=QB(I)/P:R=SQR(C*C+1):QB(I+1)=S*P*R:S=C/R:C=1/R:GOTO3110
3100 C=P/QB(I):R=SQR(C*C+1):QB(I+1)=S*QB(I)*R:S=1/R:C=C/R
3110 P=C*QE(I)-S*G:QE(I+1)=H+S*(C*G+S*QE(I))
3120 FORK=1TON:H=DE(K,I+1):DE(K,I+1)=S*DE(K,I)+C*H:DE(K,I)=C*DE(K,I)-S*H
3130 NEXT K : NEXT LM
3140 QB(L)=S*P:QE(L)=C*P:IF ABS(QB(L))-B>0THEN3020
3150 QE(L)=QE(L)+F:NEXTL
3160 FORI=1TON:K=I:P=QE(I):IFN-I<0THEN3210
3170 FORJ=I+1TON:NH=N:IFJ>NHTHEN3240
3180 IFQE(J)-P>0THEN3200
3190 K=J:P=QE(J)
3200 NEXTJ
3210 IFK-I=0THEN3230
3220 QE(K)=QE(I):QE(I)=P:FORJ=1TON:P=DE(J,I):DE(J,I)=DE(J,K):DE(J,K)=P:NEXTJ
3230 NEXTI
3240 REM
3250 YY=TI/3600-ZZ
3260 ZZ=TI/3600
3270 FOR I=1 TO N
3280 QE(I-1)=QE(I)
3290 FOR J=1 TO N
3300 DE(I-1,J-1)=DE(I,J)
3310 NEXT J
3320 NEXT I
3330 N=N-1
3340 PRINT "T";TAB(25);INT(YY+0.5);TAB(30);"PERC"
3350 PRINT "OSZCILLATOREROSSEGEK : "
3360 REM OSZCILLATOREROSSEG:
3370 REM " "
3380 BK(0)=1
3390 FOR I=0T+1 TO N
3400 BK(I)=1
3410 PL(I,1)=CL(I)
3420 PH(I,1)=CH(I)
3430 NEXT I
3440 FOR I=1 TO N
```



```

3450 M=0 : M1=0 : M2=0 : M3=0
3460 FOR J=0 TO N
3470 FOR K=0 TO N
3480 FOR L1=1 TO BK(J)
3490 FOR L2=1 TO BK(K)
3500 IF K=0 AND J=0 THEN 3770
3510 U1=PL(K,L2)
3520 U2=PL(J,L1)
3530 U3=PH(K,L2)
3540 U4=PH(J,L1)
3550 IF K=0 THEN H=SQR(2) : Z1=U2 : Z2=U4 : GOTO 3640
3560 IF J=0 THEN H=SQR(2) : Z1=U1 : Z2=U3 : GOTO 3640
3570 IF U1<U2 AND U3<U4 THEN 3750
3580 IF U1=U2 AND U3<U4 THEN : H=1 : Z1=U3 : Z2=U4 : GOTO 3640
3590 IF U1<U2 AND U3=U4 THEN : H=-1 : Z1=U1 : Z2=U2 : GOTO 3640
3600 IF U1=U2 AND U3=U4 THEN HH=1
3610 H=1 : Z1=U3 : Z2=U4 : GOTO 3640
3620 HH=0
3630 H=-1 : Z1=U1 : Z2=U2
3640 FOR J1=T(Z1) TO T(Z1)+U(Z1)-1
3650 FOR J2=T(Z2) TO T(Z2)+U(Z2)-1
3660 IF J1=J2 THEN 3680
3670 GOTO 3720
3680 M=P(J,L1)*P(K,L2)*C(Z1,J1)*C(Z2,J2)*H*DE(K,0)*DE(J,I)
3690 M1=M1+M*X(J1)
3700 M2=M2+M*Y(J1)
3710 M3=M3+M*Z(J1)
3720 NEXT J2
3730 NEXT J1
3740 IF HH=1 THEN 3620
3750 NEXT L2
3760 NEXT L1
3770 NEXT K
3780 PRINT "0";
3790 NEXT J
3800 AX(I)=M1
3810 AY(I)=M2
3820 AZ(I)=M3
3830 AM(I)=M1*2+M2*2+M3*2
3840 QS(I)=0.0875*QE(I)*AM(I)
3850 PRINT "I"
3860 PRINT " "
3870 PRINT TAB(I-1); "I*"
3880 PRINT "III"
3890 NEXT I
3900 PRINT "0"
3910 YY=TI/3600-ZZ
3920 ZZ=TI/3600
3930 PRINT "III"; TAB(25); INT(YY+0.5); TAB(30); "PERC"
3940 PRINT "-----"
3950 PRINT "ÖSSZES SZÁMOLÁSI DÖ :"; TAB(25); INT(TI/3600+0.5); TAB(30); "PERC"
3960 REM EREDMENYEK NYOMTATÁSA:
3970 REM "-----"
3980 OPEN10,4
3990 CMD10
4000 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
4010 PRINT "-----";
4020 PRINT "-----"
4030 PRINT : PRINT : PRINT
4040 PRINT "EREDMENYEK:"
4050 PRINT "000000000000"
4060 PRINT : PRINT : PRINT
4070 IF BE=0 THEN 4190
4080 PRINT MID$(STR$(LK),2,4); ". KÖLCÖNHATÁSI MATRIX:"
4090 PRINT "-----"
4100 PRINT
4110 FOR I=1 TO A+D

```



```
4120 FOR J=1 TO AC(I)
4130 PRINT "BETA (";MID$(STR$(HL(I,J)),2,4);" -";STR$(HH(I,J));")";
4140 PRINT CHR$(16);"15";"=" ";BE(HL(I,J),HH(I,J))
4150 NEXT J
4160 NEXT I
4170 PRINT
4180 GOTO 4220
4190 PRINT "KOLCSONHATASI MATRIX:"
4200 PRINT "-----"
4210 PRINT
4220 DI=8 : REM EGYMÁSMELE NYOMTATOTT MATRIXOSZLOPOK SZÁMA
4230 NM=INT((N+1)/DI)
4240 IF NM<1 THEN 4380
4250 FOR K=1 TO NM
4260 FOR I=(K-1)*DI TO N
4270 PRINT
4280 FOR J=DI*K-DI TO DI*K-1
4290 IF J>I THEN 4330
4300 XX=E(I,J)
4310 GOSUB 5160
4320 PRINT XX$;" ";
4330 NEXT J
4340 NEXT I
4350 PRINT : PRINT
4360 NEXT K
4370 IF (N+1)/DI=INT((N+1)/DI) THEN 4470
4380 FOR I=DI*NM TO N
4390 PRINT
4400 FOR J=DI*NM TO N
4410 IF J>I THEN 4450
4420 XX=E(I,J)
4430 GOSUB 5160
4440 PRINT XX$;" ";
4450 NEXT J
4460 NEXT I
4470 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
4480 PRINT "SAJATERTEKEK-SAJATVEKTOROK-OSZCILLATOREROSSEGEK:"
4490 PRINT "-----"
4500 PRINT : PRINT
4510 IF NM<1 THEN 4760
4520 FOR K=1 TO NM
4530 FOR I=DI*K-DI TO DI*K-1
4540 XX=OE(I)
4550 GOSUB 5160
4560 PRINT XX$;" ";
4570 NEXT I
4580 PRINT
4590 FOR I=0 TO N
4600 PRINT
4610 FOR J=DI*K-DI TO DI*K-1
4620 XX=DE(I,J)
4630 GOSUB 5160
4640 PRINT XX$;" ";
4650 NEXT J
4660 NEXT I
4670 PRINT : PRINT
4680 FOR I=DI*K-DI TO DI*K-1
4690 XX=OS(I)
4700 GOSUB 5160
4710 PRINT XX$;" ";
4720 NEXT I
4730 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
4740 NEXT K
4750 IF (N+1)/DI=INT((N+1)/DI) THEN 4960
4760 FOR I=DI*NM TO N
4770 XX=OE(I)
4780 GOSUB 5160
```



```
4790 PRINT XX$;" ";
4800 NEXT I
4810 PRINT
4820 FOR I=0 TO N
4830 PRINT
4840 FOR J=DI*NM TO N
4850 XX=DE(I,J)
4860 GOSUB 5160
4870 PRINT XX$;" ";
4880 NEXT J
4890 NEXT I
4900 PRINT : PRINT
4910 FOR I=DI*NM TO N
4920 XX=OS(I)
4930 GOSUB 5160
4940 PRINT XX$;" ";
4950 NEXT I
4960 PRINT : PRINT : PRINT
4970 IF BE=0 THEN 5090
4980 LK=LK+1
4990 IF LK>S0+1 THEN 5090
5000 PRINT#10
5010 CLOSE 10
5020 PRINT "----- NE KAPCSOLD KI!"
5030 PRINT "-----PROGRAMFUTAS ALLASA:"
5040 PRINT "-----"
5050 PRINT LK;" SOROZAT"
5060 PRINT "MATRIXELEMOK SZAMITASA:"
5070 ZZ=TI/3600
5080 GOTO 1880
5090 PRINT : PRINT : PRINT
5100 PRINT "FUTASID0:";INT(TI/3600+0.5);" PERC"
5110 PRINT#10
5120 CLOSE 10
5130 PRINT "----- FUTAS BEFEJEZVE!"
5140 PRINT "----- (KIKAPCSOLHATO!)-----"
5150 STOP
5160 REM FORMATUM SZUBROUTIN
5170 REM "-----"
5180 REM XX<0.00005 ESETEN XX=0 !
5190 XX=XX+.00005
5200 U=8 : REM KIIRT KARAKTEREK SZAMA
5210 IF ABS(XX)>10000000 THEN XX$=STR$(XX) : RETURN
5220 IF ABS(XX)<0.0001 THEN XX$=" .0 " : GOTO 5440
5230 XX$=STR$(XX)
5240 IF ABS(XX)=>0.01 THEN GOTO 5330
5250 M$=MID$(XX$,4,1)
5260 IF ABS(XX)>0.001 THEN Z$=".00":Y$="0":ZY$=MID$(XX$,4,1):GOTO 5280
5270 Z$=".000":Y$="":ZY$="":M$=""
5280 IF LEN(XX$)>6 THEN GOTO 5310
5290 XX$="+LEFT$(XX$,1)+Z$+MID$(XX$,2,1)+Y$
5300 RETURN
5310 XX$="+LEFT$(XX$,1)+Z$+MID$(XX$,2,1)+ZY$
5320 RETURN
5330 IF ABS(XX)<1 THEN D$=" " : GOTO 5360
5340 IF ABS(XX)<10 THEN D$=" " : GOTO 5360
5350 D$=""
5360 H$=""
5370 IF LEN(XX$)>U-1 THEN GOTO 5430
5380 Q=8-LEN(XX$)
5390 H$=""
5400 FOR W=1 TO Q
5410 H$=H$+" "
5420 NEXT W
5430 XX$=D$+XX$+H$
5440 XX$=LEFT$(XX$,U)
5450 RETURN
```



```
5460 REM PROGRAMVEG MUTATO ATALLITAS:  
5470 REM "PROGRAMVEG MUTATO ATALLITAS"  
5480 REM A PROGRAM BARMELY MODOSITAS ESETEN A PROGRAMVEG MUTATOT ATALLITANI!!!!  
5490 REM ATALLITAS: LASD A "PRINT" PROGRAM VEGEN LEIRTAKAT!!!  
5500 PRINT "100 POKE 45,";PEEK(45);": POKE 46,";PEEK(46);": RUN 110
```

READY.



ELEKTRONSZINKEP SZAMITAS (MIM)

MARTIN ANTAL  
BME FIZ-KEM. TSZ

(NITROFENOL)

BEMENŐ ADATOK:  
\*\*\*\*\*

X, Y, Z KOORDINATAK--VEGYERTEKALLAPOTU IONIZACIOS POT. ES ELEKTRONAFFINITASOK:

<u>NO</u>	<u>X</u>	<u>Y</u>	<u>Z</u>	<u>IP</u>	<u>EA</u>
BENZOL					
1	0	1.397	0	11.16	.03
2	1.2098	.6985	0	11.16	.03
3	1.2098	-.6985	0	11.16	.03
4	0	-1.397	0	11.16	.03
5	-1.2098	-.6985	0	11.16	.03
6	-1.2098	.6985	0	11.16	.03
-NITRO					
7	0	2.857	0	25.727	8.97
8	1.0479	3.462	0	17.697	2.471
9	-1.0479	3.462	0	17.697	2.471
-OH					
10	2.3876	1.3785	0	30.07	10.83

RESZRENDSZEREK  $\pi$ -CENTRUMSZAMA ( $\pi$ -C) ES  $\pi$ -ELEKTRONSZAMA ( $\pi$ -E):

	<u><math>\pi</math>-C</u>	<u><math>\pi</math>-E</u>
BENZOL	6	6
-NITRO	3	4
-OH	1	2



RESZRENDSZEREK KAPCSOLODO ATOMPARJAI ES EZEK REZONANCIAINTEGRALJA:

1. SOROZAT:

-NITRO	7 - 1	BETA (7 - 1) = -4
-OH	10 - 2	BETA (10 - 2) = -2.4

RESZRENDSZEREK LOKALISAN GERJESZTETT ALLAPOTAINAK ENERGIAI ES HULLAMFUGGVENYEI:

<u>NO</u>	<u>E(EV)</u>	<u>HULLAMFUGGVENY</u>
BENZOL		
1	4.8811	.7071(2-4) - .7071(3-5)
2	6.0774	.7071(3-4) + .7071(2-5)
3	6.738	.7071(2-4) + .7071(3-5)
4	6.738	.7071(2-5) - .7071(3-4)
-NITRO		
5	6.2616	1(8-9)
-OH		

FIGYELEMBEVETT CT ATMENETEK:

BENZOL : -NITRO:	2 - 9	3 - 9
-OH : BENZOL:	10 - 4	10 - 5
-OH : -NITRO:	10 - 9	

RESZRENDSZEREK MOLEKULAPALYAINAK ATOMI PALYAKOEFFICIENSEI:

MOL.PALYA ATOMI PALYAKOEFFICIENSEK

BENZOL	
1	$\theta(1) - \theta(2) - \theta(3) - \theta(4) - \theta(5) - \theta(6)$
2	$\theta(1) + .5(2) + .5(3) - \theta(4) - .5(5) - .5(6)$
3	$.57735(1) + .28868(2) - .28868(3) - .57735(4) - .28868(5) + .28868(6)$
4	$.57735(1) - .28868(2) - .28868(3) + .57735(4) - .28868(5) - .28868(6)$
5	$\theta(1) - .5(2) + .5(3) - \theta(4) - .5(5) + .5(6)$
6	$\theta(1) - \theta(2) - \theta(3) - \theta(4) - \theta(5) - \theta(6)$
-NITRO	
7	$.73(7) + .484(8) + .484(9)$
8	$\theta(7) - .707(8) + .707(9)$
9	$.684(7) - .516(8) - .516(9)$
-OH	
10	1(10)



CENTRUMOK KOZTI TAVOLSAG MATRIX:

	1	2	3	4	5	6	7
1	.0	1.3970	2.4197	2.7940	2.4197	1.3970	1.4600
2	1.3970	.0	1.3970	2.4197	2.7939	2.4196	2.4744
3	2.4197	1.3970	.0	1.3970	2.4196	2.7939	3.7557
4	2.7940	2.4197	1.3970	.0	1.3970	2.4197	4.2540
5	2.4197	2.7939	2.4196	1.3970	.0	1.3970	3.7557
6	1.3970	2.4196	2.7939	2.4197	1.3970	.0	2.4744
7	1.4600	2.4744	3.7557	4.2540	3.7557	2.4744	.0
8	2.3157	2.7682	4.1636	4.9707	4.7336	3.5685	1.2100
9	2.3157	3.5685	4.7336	4.9707	4.1636	2.7682	1.2100
10	2.3877	1.3600	2.3877	3.6612	4.1539	3.6611	2.8083

	8	9	10
1	2.3157	2.3157	2.3877
2	2.7682	3.5685	1.3600
3	4.1636	4.7336	2.3877
4	4.9707	4.9707	3.6612
5	4.7336	4.1636	4.1539
6	3.5685	2.7682	3.6611
7	1.2100	1.2100	2.8083
8	.0	2.0958	2.4770
9	2.0958	.0	4.0179
10	2.4770	4.0179	.0

RESZRENDSZEREK KISERLETI IONIZACIOS POTENCIALJA ES ELEKTRONAFFINITASA:

	<u>IP (EV)</u>	<u>EA (EV)</u>
BENZOL	9.245	-1.1
-NITRO		-.56
-OH	10.83	



EREDMENYEK:

\*\*\*\*\*

1. KÖLCSÖNHATÁSI MATRIX:

BETA (7 - 1) = -4  
BETA (10 - 2) = -2.4

.0							
.0	4.8811						
.0	.0	6.0774					
.0	.0	.0	6.7380				
.0	.0	.0	.0	6.7380			
.0	.0	.0	.0	.0	6.2616		
.0	-1.1169	.0	-1.1169	.0	.0	6.5397	
-2.2338	.0	-1.1169	.0	1.1170	.0	.0	6.2195
.9798	.8485	.4899	.8485	-.4898	.0	.0	.0
1.6971	-.4898	.8485	.4899	.8485	.0	.0	.0
.0	.0	.0	.0	.0	.0	1.2000	.6928
8.0749							
.2338	7.8049						
-1.5795	.0	7.5758					

SAJATERTEKEK-SAJATVEKTOROK-OSZCILLATOREROSSEGEK:

-1.1655	3.6777	5.0029	5.4962	5.9083	6.2616	7.0386	7.2573
.9258	.0763	.2459	.0615	-.0353	.0	-.0040	-.0326
.0030	-.7050	.2695	.3952	.4471	.0	-.1055	-.0560
.0745	-.0584	-.5723	-.2909	.6181	.0	-.0149	-.1005
.0243	-.2409	.0188	-.5055	-.2597	.0	-.5918	-.3007
-.0300	.1087	.4199	-.4004	.3827	.0	.3352	.1520
.0	.0	.0	.0	.0	-.9999	.0	.0
.0110	-.4880	.0725	-.3350	-.2083	.0	-.0314	.5993
.3001	-.0836	-.5594	.1786	-.0412	.0	-.0714	.3596
-.1093	.2920	.0955	.0721	.1233	.0	-.2804	.6183
-.1776	-.1132	-.0668	.3928	-.2486	.0	.0509	-.0233
-.0450	.2835	.1755	.1886	.2840	.0	-.6622	.0262
.0	.0622	.5111	.6397	.2363	.5491	.3958	.2286
8.1588	8.8576	10.4173					
-.1510	.1657	-.1418					
-.1229	-.1615	-.1364					
-.2960	.2640	-.1792					
.3238	.0814	-.2560					
.5035	.3199	.1132					
.0	.0	.0					
-.3775	.1461	.2767					
.6010	-.0621	.2382					
.0114	-.0846	-.6362					
.0584	.8321	-.1900					
-.0936	.2075	.5287					
.1158	.1092	.0287					



IRODALOM

- [1] Martin A., Szőke J.: KFKI Report 88 /1985/
- [2] Martin A., Szőke J.: KFKI Report

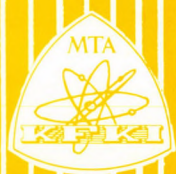












Kiadja a Központi Fizikai Kutató Intézet  
Felelős kiadó: Kroó Norbert  
Szakmai lektor: Kiss Á. István  
Példányszám: 220 Törzsszám: 85-665  
Készült a KFKI sokszorosító üzemében  
Felelős vezető: Tőreki Béláné  
Budapest, 1985. december hó